

*Н. С. Митрофанова*  
УрФУ им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,  
г. Екатеринбург  
*Э. Д. Курбанова, Л. К. Ригмант, В. А. Полухин*  
Институт металлургии УрО РАН,  
г. Екатеринбург  
*Natashka10102@mail.ru*

**ТЕРМОСТАБИЛЬНЫЕ ИНТЕРФЕЙСНЫЕ СТРУКТУРЫ,  
СФОРМИРОВАННЫЕ ВЗАИМОПОЛОЖЕНИЕМ НАНОПЛЕНОК  
D-МЕТАЛЛОВ С МОНОСЛОЯМИ ГРАФЕНА, СИЛИЦЕНА,  
ГЕРМАНЕНА, СТАНЕНА**

На основе компьютерного моделирования термической эволюции 2D и 3D нанокластеров D-металлов выявлены особенности зарождения и активации кинетических процессов, определяющих температуры начала структурных трансформаций и потери термической устойчивости функциональных элементов, происходящих в двумерных системах нанокластеров и пленок переходных металлов, размещенных на графеновых (Pd, Ag, Cu), силициновых (Ag, Pt) и германеновых (Pt, Au) подложках и образующих с ними в результате контакта специфическую поверхность раздела (интерфейс) с разными по величине энергиями связи.

*Ключевые слова:* нанокластеры, МД-моделирование, граница раздела метал/графен, графеновая подложка.

Analyzing MD simulation data on the thermic evolution of transition d-metal 2D and 3D nanoclusters, deposited on grapheme (Pd, Ag, Cu), silicene (Ag, Pt) and germanene (Pt, Au) substrates the behavior specificities of such main factors of melting processes and premelting stage including as the nucleation and the kinetic activation of surface or upper shell fluidization of low dimension metal systems and coordination transformation especially in contact interlayer zones of grain and planes of low dimension interface transition metal systems/substrate (graphene, silicene and germanene) with different cohesive energies have been revealed and the following sharp thermostability decreasing of nanosystems, as the consisting and functional interactive units of the whole effective electronic and catalytic systems has been displayed also.

*Keywords:* nanocluster, MD simulation, interlayer surface zone (interface) of metal/graphene, graphene, silicene, germanene substrates.

С развитием метода химического газофазного осаждения (CVD), а также лучевой эпитаксии металлов на заранее приготовленные (CVD-методом) подложки – этими методами успешно проведен синтез материа

лов – со специфическими контактными поверхностями раздела графен/Me на плоскостях ГПУ (001) Co и Ru, для ГЦК (111) Ni, Pt, Pd, а также Ir. Наиболее полно экспериментально исследованы системы контактных пар металлов Ir-, Ru-, Pd-графен [1].

Этот успешный опыт применения техники лучевой эпитаксии и газофазного синтеза с формированием структур монослоев и стопок графена приемлемых размеров стимулировали попытки получения таким же методом двумерных кристаллов других полупроводников – Si, Sn и Ge [2]. Как и в случае графена, поверхность раздела (интерфейс) сформировалась в результате сорбции (адсорбции или хемосорбции) во многом благодаря нанодиапазону и особому характеру межплоскостного взаимодействия. Высокая проводимость электронов в гетероструктурных материалах Me/графен, Me/Si достигнута под воздействием электромагнитных полей в произведенных переключателях электропроводности и накопителях заряда (конденсаторах), фоточувствительных транзисторах, химических сенсорах и др. Подобные функциональные гетероструктуры (свитчеры, транзисторы и т. д.) сформированы (как и уже имеющиеся для графена), в контактных областях при эпитаксиальном осаждении атомов Si, Ge и даже Sn (островковые пленки) на металлические подложки, воспроизводя взаимоналожение несоизмеримых по периоду гексагональных решеток, соответственно, силицена, германена и станена с поверхностями металлов [3]. Первоначальные попытки синтезировать германен как двумерный кристалл германия на поверхности (111)-Ag были безуспешными из-за нестабильности, обусловленной «магической» несоизмеримостью параметров решеток – гексагональной Ge и ГЦК – Ag, когда более устойчивой оказалась интерфейсная структура, формируемая фазой  $\text{Ag}_2\text{Ge}$  (треть атомов Ag поверхности контактного монослоя замещались атомами Ge), в отличие от синтеза силицена с волнистой поверхностью на (111)-Ag с четкой границей раздела [4]. Это приводило не только к неконтролируемым структурным искажениям координаций германия, но и к нежелательным изменениям электронных свойств. В представленной работе проведен сравнительный анализ процессов формирования как элементарных 2D-кластеров (CN, SiN) так и гетероструктурно-слоистых композитов (с интерфейсами CN/Me, SiN/Me: Pd, Ni, Cu, Al) их термической эволюции на основе МД-моделирования с привлечением разработанных потенциалов межчастичных взаимодействий [5]. Так структура интерфейсных состояний двумерных кристаллов кремния (силицена) на металлических субстратах оказалась не вполне планарной (при суммарной толщине интерфейса Si-Me 1,6 нм), а ребристой (волнистой), но не настолько с выраженными  $\text{sp}^2/\text{sp}^3$  гибридованными координациями, как в случае модельных ребристых Si-сфероидов (рис. 1) [6]. В той же степени и транспорт заряда в силицене реализовывался током безмассовых высокоскоростных фермионов ( $\sim 10^5 \sim 10^6$  м/с), учитывая линейную зависимость дисперсии энергии  $E(k)$  и

равенство нулю ее второй производной.

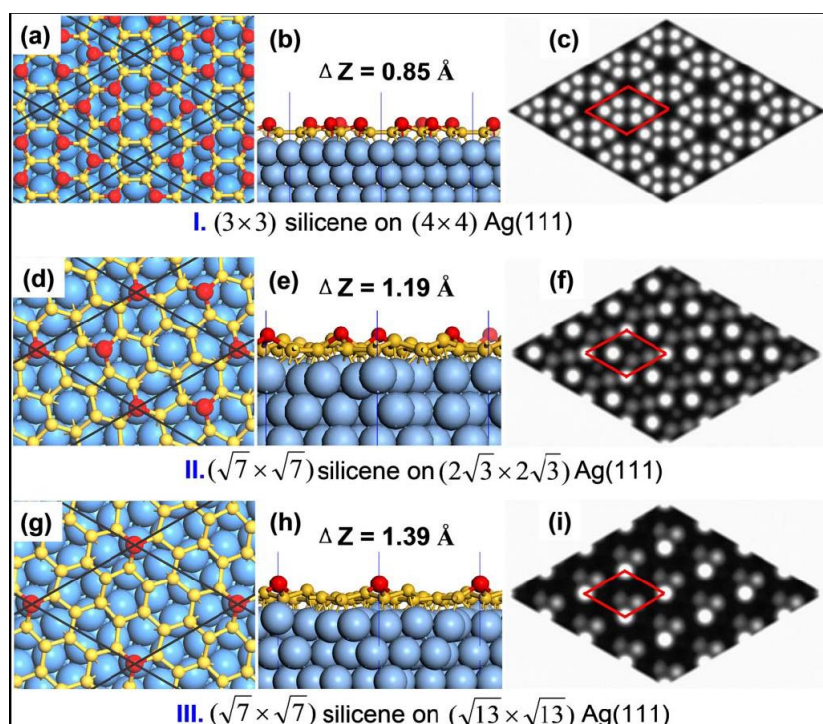


Рис. 1. Характер размещения атомных структур (I–III) силицена (на суперструктурах Ag) и соответствующие им модельные СТМ-образы (*c, f, h*): *a, d, g* и вид сверху; *b, e, h* – вид сбоку;  $\Delta Z$  – отклонение от планарности; размеры атомов, максимально удаленных ( $\sim 0,2$  нм), даны с увеличением и темно-окрашенные [2]

Из анализа внешней поверхности силицена моделируемой структуры (I, *c*) очевидно, что двойные кольца (внутренние – из 6 атомов, внешние – из 12) сформированы только из  $1/3$  атомов Si, что вполне согласуется с СТМ-проекциями [2]. Тогда как для структуры (II) в формировании ячеек суперрешетки участвуют только пары атомов Si, дистанцированные на  $0,576$  нм и являющиеся  $1/7$  атомов Si, находящихся на его внешней стороне (рис. 1, *f*). Из анализа суперструктуры (III) следует, что в формировании гексагональных колец задействовано по 1 внешнему атому Si. Таким образом, имеет место существенное снижение в ряду структур I–III числа атомов Si, нарушающих планарность силицена (рис. 1, *i*), что соответствует экспериментальным наблюдениям СТМ [2]. В рамках экспериментальных исследований СТМ и LEED были также идентифицированы и выявлены особенности гексагональных структур германена, а также определены масштабы их искажения [3].

Однако самыми удивительными оказались результаты квантово-механических расчетов в рамках теории функционала плотности и квантового аналога МД-моделирования характеристик «станена» – 2D-кристалла

олова, а также станена, границы которого с ненасыщенными связями пассивированы атомами водорода, по сути – аналога графана. Как и стехиометрические 3D-кристаллы  $\text{Bi}_2\text{Si}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ,  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ , 2D-кристаллы  $\text{HgTe}$  (материалы со свойствами квантовой ямы) в соответствии с данными прогностических расчетов, 2D-кристалл  $\text{Sn}$  также может быть отнесен по электронным свойствам и состоянию к материалам TLs – топологическим квантово-спиновым изоляторам [4].

### Список литературы

1. *Полухин В. А.* Зависимость термостабильности интерфейсных состояний D-металлов (Cu, Pd, Ti, Ni) и Al с графеном от характера сорбции и диффузионной подвижности в контактной зоне / В. А. Полухин, Э. Д. Курбанова // Журнал ФХ. 2015. Т. 89, № 3. С. 3–21.
2. *Vogt P. De Padova.* Silicene: Compelling Experimental Evidence for Graphenelike Two-Dimensional Silicon / Vogt P. De Padova. Quaresima. J. Avila, E. Frantzeskakis, M. Asensio A. Resta // Phys. Rev. Lett. 2012. Vol. 108. P. 15550 (1-5).
3. *Dávila M. E. Xian L. Cahangirov S.* et al. Germanene: a novel two-dimensional germanium allotrope akin to graphene and silicone // New J. Phys. 2014. Vol. 16. P. 095002 (1-10).
4. *Yong Xu, Binghai Yan, Hai-Jun Zhang* et al. Large-Gap Quantum Spin Hall Insulators in Tin Films // Phys. Rev. Lett. 2013. Vol. 111. P. 136804 (1–5).
5. *Polukhin V. A.* Classification of Functional D-metal / V. A. Polukhin, E. D. Kurbanova, A. E. Galashev. Graphene Interfaces According to a Sorption Mechanism and the Resistance to Thermoactivated Disorder and Melting. MD Simulation // Russian Metallurgy (Metally). 2014. № 8. P. 633–646.
6. *Galashev A. Y.* Computer Investigation of the Stability & Structure of Si &  $\text{SiO}_2$  Nanoparticles / A. Y. Galashev, Polukhin. USA, New York: Nova Science Publishers. Inc., 2012. 130 V. A.p.